



DATOS IDENTIFICATIVOS

Química física II

Asignatura	Química física II			
Código	V11G200V01403			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimstre
	9	OB	2	2c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego			
Departamento	Química Física			
Coordinador/a	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Graña Rodríguez, Ana María Hermida Ramón, José Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio Pastoriza Santos, Isabel Peña Gallego, María de los Ángeles Pérez Juste, Ignacio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descripción	Aplicación de los principios y métodos de la Mecánica Cuántica al estudio de la estructura molecular y la espectroscopia.			

Competencias

Código	
C3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
C6	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de termodinámica y sus aplicaciones en Química
C8	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principales técnicas de investigación estructural, incluyendo la espectroscopia
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C21	Reconocer e implementar buenas prácticas científicas de medida y experimentación
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
C28	Interpretar datos derivados de las observaciones y mediciones del laboratorio en términos de su significado y relacionarlos con la teoría adecuada
C29	Demostrar habilidades para los cálculos numéricos y la interpretación de los datos experimentais, con especial énfasis en la precisión y la exactitud
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje		
Formular hamiltonianos moleculares, utilizar sobre ellos la aproximación de Born-Oppenheimer y discutir sus consecuencias.	C3	D1	
	C20	D3	
	C22	D4	
	C23	D5	
		D6	
		D7	
		D9	
		D12	
		D13	
		D14	
	Manejar superficies y perfiles de energía potencial y los conceptos relativos a ellas.	C3	D1
		C19	D3
		C20	D4
		C22	D5
C28		D6	
C29		D7	
		D9	
		D12	
		D13	
		D14	
Aplicar los métodos OM y EV para la descripción del enlace químico en sistemas simples y conocer (con su origen) las limitaciones de estos métodos.		C3	D1
	C8	D3	
	C19	D4	
	C20	D5	
	C21	D6	
	C22	D7	
	C23	D9	
	C27	D12	
	C28	D13	
	C29	D14	
		D15	
Describir las técnicas de localización orbital y el fundamento de la hibridación de orbitales atómicos.	C3	D1	
		D3	
		D4	
		D6	
		D9	
	Aplicar (conociendo fundamentos y limitaciones) los principales métodos de cálculo para el estudio de estructuras moleculares (HF, DFT, post-HF).	C3	D1
C19		D3	
C20		D4	
C22		D5	
C23		D6	
C28		D7	
C29		D9	
		D12	
		D13	
		D14	
Describir las formas de interacción radiación-materia y formular reglas de selección de dipolo eléctrico.		C8	D1
		D3	
		D4	
		D6	
		D9	
	Vincular la frecuencia de la radiación con el movimiento molecular responsable de una transición espectroscópica.	C8	D1
		D3	
		D4	
		D6	
		D7	
		D9	
Justificar el ensanchamiento de las líneas espectrales y el efecto del medio sobre los espectros.	C8	D1	
		D3	
		D4	
		D6	
		D9	

Interpretar espectros de rotación y vibración-rotación para obtener información estructural, haciendo uso de los modelos cuánticos simples (rotor rígido y flexible y osciladores armónico y anarmónico), reglas de selección y técnicas de asignación de líneas.	C3 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9 D12 D13 D14
Discutir el principio de Franck-Condon y sus consecuencias.	C3 C8	D1 D3 D4 D6 D9
Interpretar espectros electrónicos y fotoelectrónicos, determinando información estructural a partir de ellos, y conocer sus fundamentos.	C3 C8 C19 C22	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D9
Describir los diferentes procesos de desactivación de estados electrónicos excitados y representarlos en un diagrama de Jablonski.	C8 C19	D1 D3 D4 D6 D9
Describir los fundamentos de las espectroscopias de resonancia magnética e interpretar el origen físico del desplazamiento químico y de los acoplamientos presentes en los espectros de RMN.	C8 C19 C22	D1 D3 D4 D6 D9
Describir las peculiaridades instrumentales de las técnicas espectroscópicas en las diferentes regiones espectrales, así como los fundamentos y aplicaciones del láser y de las técnicas basadas en la transformada de Fourier.	C8	D1 D3 D4 D6 D9
Aplicar los conocimientos teóricos adquiridos en Química Física I para determinar experimentalmente constantes de equilibrio químico, coeficientes de actividad y magnitudes termoquímicas.	C6 C19 C20 C21 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15

Nueva

Contenidos

Tema

Introducción a la teoría de grupos de simetría en química	- Elementos y operaciones de simetría. - Grupos puntuales de simetría. - Representaciones matriciales. - Representaciones irreducibles. Tablas de caracteres. - Aplicaciones químicas.
Aspectos cualitativos de la estructura electrónica molecular.	- Aproximación de Born-Oppenheimer. - Molécula H ₂ ⁺ . - Método OM para moléculas diatómicas homo y heteronucleares. - Método OM en moléculas poliatómicas. - Método EV.
Tratamientos cuantitativos para el estudio de la estructura electrónica molecular.	- Método Hartree-Fock. - Métodos post-Hartree-Fock. - Métodos semiempíricos. - Cálculo de propiedades moleculares

Introducción a la Espectroscopia Molecular.	<ul style="list-style-type: none"> - Interacción radiación-materia. Planteamiento general. - Integral momento dipolar de transición. Reglas de selección. - Intensidad y posición de las transiciones espectrales. - Instrumentación.
Espectroscopia de Rotación.	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de rotación pura de moléculas diatómicas. Modelos del rotor rígido y elástico. - Espectros de rotación pura de moléculas poliatómicas. - Espectros Raman de rotación pura. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia de Vibración-rotación.	<ul style="list-style-type: none"> - Espectros de vibración-rotación de moléculas diatómicas. Modelos del oscilador armónico y anarmónico con rotación dependiente de la vibración. - Espectros de vibración-rotación de moléculas poliatómicas. - Espectroscopia Raman de vibración-rotación. - Instrumentación y aplicaciones.
Espectroscopia Electrónica.	<ul style="list-style-type: none"> - Estados electrónicos de las moléculas. - Estructura de vibración-rotación. Principio de Franck-Condon. - Grupos cromóforos y auxocromos. - Procesos de desactivación electrónica. - Instrumentación y aplicaciones. - Láseres. - Espectroscopia fotoelectrónica y relacionadas.
Espectroscopias de Resonancia.	<ul style="list-style-type: none"> - Introducción a la resonancia magnética. - Desplazamiento químico. - Interacción espín-espín. Constante de acoplamiento. - Espectroscopia de resonancia de espín electrónico.
Prácticas de Termodinámica Química (seis sesiones)	<ul style="list-style-type: none"> - Determinación experimental de constantes de equilibrio empleando técnicas espectrofotométricas o potenciométricas. - Determinación experimental de entalpías de combustión, disolución, neutralización, fusión o vaporización. - Propiedades coligativas. - Determinación experimental de coeficientes de actividad empleando una técnica potenciométrica.
Prácticas de Química Cuántica y Espectroscopia (siete sesiones).	<ul style="list-style-type: none"> - Estudio computacional de la estructura electrónica de diferentes moléculas - Estudio computacional de isomería conformacional. - Estudio computacional de procesos químicos simples. - Predicción, interpretación teórica y resolución del espectro de vibración-rotación del HCl en fase gas. - Espectroscopia electrónica: Espectro de la molécula de I₂ en fase gas.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	39	65
Seminarios	26	39	65
Prácticas de laboratorio	45.5	4.5	50
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	0	10	10
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	8	12
Informes/memorias de prácticas	0	9	9
Pruebas de respuesta corta	2	5	7
Pruebas de tipo test	0	4	4
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	1	2	3

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Consistirán en la exposición de los aspectos fundamentales de cada tema por parte del profesor, tomando como base el material disponible en la plataforma TEM@ (esquemas, boletines de problemas, ...). Además de la exposición de temas, también se formularán problemas numéricos que ayuden a comprender y asentar los conceptos.

Seminarios	Las clases de seminario serán principalmente labor del alumno, bajo la supervisión del profesor, y se emplearán fundamentalmente para: - Resolución de problemas, tanto de manera individual como en grupo. - Incidir, una vez el alumno trabaje los aspectos básicos, sobre aquellos contenidos de cada tema que puedan presentar una mayor complejidad.
Prácticas de laboratorio	Realización bajo la supervisión del profesor pero de manera autónoma, de prácticas de laboratorio o de química computacional. Las dichas prácticas se realizarán por parejas y en sesiones de 3,5 horas. Con la antelación suficiente, los alumnos dispondrán en la plataforma TEM@ de los guiones de las prácticas a realizar junto con todo el material adicional necesario. El guion presentará los elementos esenciales para realizar la práctica a nivel experimental o computacional, así como los puntos básicos de su fundamento teórico y del tratamiento de los datos. Al finalizar las prácticas, y dentro del plazo que fije el profesor, será necesario entregar el correspondiente informe, elaborado siguiendo las directrices dadas por el profesor.
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar para entregar al profesor en el plazo que se fije.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Seminarios	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Prácticas de laboratorio	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas	Descripción
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Informes/memorias de prácticas	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas de respuesta corta	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas de tipo test	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	En el horario de tutorías del profesor se resolverán de forma individualizada y más personal aquellas dudas de los alumnos que puedan surgir al largo del curso en cualquiera de sus aspectos (clases de teoría o seminario, clases de laboratorio y los distintos tipos de actividades autónomas a realizar).

Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje

Prácticas de laboratorio	Se puntúan aquí junto con el esfuerzo y la actitud, las destrezas y las competencias desarrolladas por el alumno durante la realización de las distintas prácticas.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C20 C21 C22 C27 C28	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas y/o ejercicios de forma autónoma	Para cada uno de los temas o grupos de temas, se propondrán determinados "Problemas Evaluables" u otros trabajos que el alumno deberá resolver o realizar.	ata 3,75	C3 C8 C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D9 D12 D13 D14 D15
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Realización de una prueba escritura global al final del cuatrimestre, en la fecha fijada por la Junta de Facultad.	como mínimo 52,5	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Informes/memorias de prácticas	Se realizará el informe de una práctica propuesta por los profesores que se deberá presentar cuidando los aspectos formales relativos a la organización, uso correcto de las unidades, confección correcta de las gráficas y exposición de los resultados. Se valorará también el análisis crítico de estos y la obtención de conclusiones. Además se evaluarán todas las prácticas realizadas mediante cuestiones orales que los alumnos podrán responder a la vista de su libreta de laboratorio.	ata 5,0	C3 C6 C8 C19 C20 C22 C23 C27 C28 C29	D1 D3 D4 D5 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Pruebas de respuesta corta	Realización a lo largo del cuatrimestre, en las fechas fijadas por la Junta de Facultad, de dos pruebas cortas de carácter no liberatorio.	hasta 15	C3 C8 C19 C20 C22	D1 D3 D6 D9 D12 D14 D15
Pruebas de tipo test	Al finalizar cada tema o grupo de temas el alumno tendrá, a través de la plataforma TEM@, la posibilidad de responder un "test de autoevaluación" autocorregible.	ata 3,75	C3 C8 C19	D3 D4 D6 D7 D9 D12 D14 D15
Pruebas prácticas, de ejecución de tareas reales y/o simuladas.	Esta prueba escrita se realizará en la fecha fijada por la Xunta de Facultad y versará sobre los conocimientos y destrezas que el alumno debe haber adquirido durante el desarrollo de las sesiones de prácticas. Las preguntas se situarán, en algunos casos, en el contexto de algunas de las experiencias realizadas por el alumno y, en otros, tendrán un ámbito más general. A través de las dichas preguntas se evaluará su capacidad para resolver los problemas presentados.	ata 10,0	C3 C6 C8 C19 C21 C22 C28 C29	D1 D3 D4 D6 D7 D9 D12 D13 D14 D15

Otros comentarios sobre la Evaluación

La evaluación del curso tendrá en cuenta los aspectos mencionados mas arriba, distinguiendo entre la parte teórica y la parte práctica de la asignatura.

Parte Teórica: Su evaluación supondrá, en su conjunto (pruebas cortas (20%), prueba larga (70%), resolución

deproblemas/trabajos (5%), test de autoevaluación (5%)), un 75% de la calificación final de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la prueba larga una calificación mínima de 4,0 sobre 10,0 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta será únicamente la calificación de este examen, no contabilizándose ninguno de los demás apartados.

Además, será necesario obtener un promedio de 3,0 en las cuestiones indicadas como teóricas en los exámenes (pruebas cortas y larga). Si no se alcanzase esta puntuación la nota reflejada en el acta no podrá superar 4,0.

Parte Práctica: Su evaluación contribuirá, en su conjunto (prácticas de laboratorio (40%), informes y cuestiones orales(20%) y prueba escrita de prácticas (40%)), un 25% a la calificación final de la materia.

Es requisito imprescindible para superar la materia obtener en la parte práctica una calificación mínima de 5,0 sobre 10 puntos. En el caso de no alcanzar dicha puntuación la calificación que se reflejará en el acta no podrá superar 4,0.

La asistencia a las sesiones prácticas es obligatoria (se admitirán ausencias a sesiones debidamente justificadas) y, por lo tanto, no es posible aprobar la materia en el caso de no haberlas realizado.

Condición de presentado/no presentado: La realización de las dos pruebas cortas, o de la prueba escrita de prácticas, o de la prueba larga o la asistencia a más de cinco sesiones de laboratorio, implicará la condición de [presentado/a] y, por lo tanto, la asignación de una calificación.

Segunda Oportunidad: Para la evaluación en la segunda oportunidad, se mantendrán las calificaciones y los porcentajes de las pruebas cortas, de los problemas/trabajos propuestos, de las prácticas de laboratorio y los correspondientes informes y de los test de autoevaluación. En el caso de tener una calificación igual o superior a 5,0 puntos en la prueba global (larga) o igual o superior a 4,0 en la prueba escrita de prácticas, se mantendrá dicha calificación (y el porcentaje) y solo será necesario realizar a otra.

Fuentes de información

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J., **Química Física**, 8ª edición,

BERTRÁN, J.; BRACHANDELL, V.; MORENO, M.; SODUPE, M., "**Química Cuántica**", 2ª edición,

BERTRÁN RUSCA, J.; NÚÑEZ DELGADO, J., "**Química Física**" (vol. I), 1ª edición,

Bibliografía Complementaria:

□ ATKINS P. W., FRIEDMAN R.S., "Molecular Quantum Mechanics" (5ª Edición). Oxford University Press. (2011).

□ LEVINE I.N., "Química Cuántica" (5ª ed.), Prentice Hall (2001).

□ LEVINE I.N., "Quantum Chemistry" (7ª ed.), Pearson (2014).

□ LEVINE I.N., "Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2004).

□ REQUENA A., ZÚÑIGA J., "Espectroscopía", Pearson Prentice Hall (2004).

Libros de problemas:

□ CARBALLEIRA OCAÑA L., PÉREZ JUSTE I., "Problemas de Espectroscopía Molecular", Netbiblo (2008).

□ LEVINE I.N., "Problemas de Fisicoquímica" (5ª ed.), McGraw Hill (2005).

Libros de prácticas:

□ GARLAND C.W., NIBLER J.W., SHOEMAKER D.P., "Experiments in Physical Chemistry" (7ª ed.), McGraw-Hill (2003).

□ FORESMAN J.B., FRISH A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: a guide to using Gaussian" (2ª ed.), Gaussian Inc (1996).

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Herramientas informáticas y de comunicación en química/V11G200V01401

Métodos numéricos en química/V11G200V01402

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Física III/V11G200V01301

Química física I/V11G200V01303
